УДК 543.681.5.068

РАЗРАБОТКА ЛАБОРАТОРНОЙ ИНФОРМАЦИОННО-УПРАВЛЯЮЩЕЙ СИСТЕМЫ

О.В. Терещенко, А.Г. Терещенко, В.А. Терещенко, А.М. Янин, Т.В. Толстихина

НИИ высоких напряжений Томского политехнического университета
E-mail: git@hvd.tpu.ru

Представлены результаты актуального направления работы НИИ ВН по разработке программного комплекса ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» для автоматизации деятельности аналитических лабораторий. Рассмотрены функции комплекса и методологические принципы его разработки, проведено сравнение с зарубежными аналогами. Описана модель производственного аналитического контроля с использованием понятий цикл жизни лаборатории, методики и пробы.

В современной экономике ведущих стран мира важная роль принадлежит информационным технологиям (ИТ). В России это, пожалуй, одна из немногих отраслей, которая за последние 15 лет неуклонно развивается по восходящей. Однако в значительной степени отрасль развивается, основываясь на программном обеспечении (ПО), получаемом из-за рубежа. Круг задач, решаемых с помощью ИТ, постоянно растет. Для отражения российской производственной специфики и обеспечения информационной безопасности необходимо разрабатывать отечественное ПО.

Как известно, параметры качества продукции, выпускаемой любым предприятием, контролируются аналитическими лабораториями. В функциональные обязанности аналитических лабораторий входит всесторонний контроль качества на всех стадиях производства товара – от исходного сырья до поставляемого готового продукта. В связи с этим в своей деятельности лаборатории оперируют большим объемом разнородной информации. Многочисленные информационные потоки, охватывающие лабораторию, имеют, как правило, сложную структуру. Движение информации вы-

полняется зачастую при помощи ее ручного переписывания из одного бумажного документа в другой и последующей передачи документов заинтересованным подразделениям, лицам и организациям. Результатами действия подобной схемы являются: низкая оперативность использования данных, слабая управляемость аналитического процесса, затрудненный аудит, вероятность искажения полученных результатов и т.д. В итоге лаборатория не способна обеспечить стратегическую задачу повышения конкурентоспособности продукции через функционирование полноценной системы менеджмента качества.

В результате анализа сложившейся ситуации актуальность задач по разработке ПО для аналитических лабораторий различных предприятий не вызывает сомнений. Работа в этом направлении привела к созданию программного продукта, который прошел несколько стадий разработки: от автоматизированного рабочего места (АРМ) и лабораторно-информационной системы (ЛИС) до нынешнего состояния – лабораторной информационно-управляющей системы (ЛИУС) «Химик-аналитик» [1–9]. Развитие программы диктовалось потребителем по мере внедрения разработки. АРМ соответствовало целям локальной автоматизации работы лаборантов и инженеров. ЛИС позволила выйти на общелабораторный уровень, обеспечить единое информационное пространство лаборатории и реализовать внутрилабораторный контроль. ЛИУС решает комплексную задачу автоматизации деятельности лаборатории, включая управление лабораторией, и, соответственно, ориентирована не только на лаборантов и инженеров, но и на руководство лаборатории. ЛИС «Химик-аналитик» зарегистрирована в Реестре программ для ЭВМ Федеральной службой РФ по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам (свидетельство № 2004612298 от 7 октября 2004 г.) [10].

Сегодня программный комплекс ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» охватывает все основные функции аналитической лаборатории и обеспечивает выполнение следующих задач:

- управление работами и ресурсами, планирование работ в аналитической лаборатории (блок управления в составе ЛИУС);
- ведение различных электронных лабораторных журналов с метрологической обработкой результатов анализа;
- ведение вспомогательных журналов приготовления растворов, учета прихода и расхода реактивов, химпосуды и оборудования, инженерно-экологических расчетов;
- внутрилабораторный контроль в соответствии с ГОСТ Р ИСО 5725-2002 и МИ 2335-2003;
- автоматизированный документооборот аналитической лаборатории;
- статистическая обработка результатов измерений и представление их в виде выходных документов лаборатории: отчетов, протоколов анализов, графиков и диаграмм;
- организация системы менеджмента качества лаборатории по ГОСТ Р ИСО 17025-2000.

Обзор рынка лабораторно-информационных систем, проведенный независимой аналитической компанией ЗАО «ЛИМС» по итогам 2003 г., показал, что разработка НИИ ВН «Химик-аналитик» занимает одно из ведущих мест по внедрению на территории России [11]. Несмотря на то, что на тот момент только 8 предприятий приобрели данный программный продукт, доля «Химик-аналитик» в объеме внедрений составляла 40 %. Сегодня на счету коллектива более 70 лабораторий, оснащенных программным продуктом «Химик-аналитик» в том или ином виде (рис. 1). В их числе – лаборатории наиболее успешных предприятий России, таких как ОАО «Магнитогорский металлургический комбинат» и «Нижнетагильский металлургический комбинат», ООО «Тюментрансгаз» (г. Югорск), ОАО «Красноярскэнерго», НК «ТНК» (г. Нижневартовск), ОАО «Кокс» (г. Кемерово), ООО «Ямбурггаздобыча» и др. Проведенный обзор выявил еще одну важную особенность, которая заключается в том, что программный продукт «Химик-аналитик» лидирует также по количеству отраслей внедрения: черная и цветная металлургия, нефтяная, газовая и химическая отрасли, энергетика и др. По данным [12] в рейтинге ИТ-компаний Сибири и Томска по объему продаж НИИ ВН занимает 25-е и 3-е место соответственно.

В ходе маркетинга выяснилось, что основными конкурентами при продвижении ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» на рынке оказались крупнейшие зарубежные разработчики программного обеспечения. За рубежом это направление успешно развивается с 1985 г. [13, 14]. На начало века на мировом рынке LIMS (LIMS – Laboratory Information Management Systems) было представлено около 50 фирм – производителей LIMS-продуктов [11]. Некоторые из западных фирм («Creon Lab Control AG» («Waters») с Q~DIS\QM LIMS и «LabWare Inc» с LabWare-LIMS) активно действуют на российском рынке сами по себе или через российских посредников [11, 15, 16]. Отечественные разработки в этой области не составляют для ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» серьезной конкуренции в силу того, что сегодня они не способны автоматизировать работу аналитических лабораторий в полном объеме [17–19].

Высокая коммерческая востребованность ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» на отечественных предприятиях подтвердила правильность заложенной в основу ее разработки научной методологии. Более детальное знакомство с зарубежными LIMS и сравнение их с ЛИУС «Химик-аналитик», несмотря на общую цель – обслуживание испытательных химических лабораторий, выявило и методологическое различие. В основу методологии разработки западных программных продуктов положен взгляд на LIMS как на управленческие программы с точки

зрения бизнес-процессов предприятия в целом [20]. Эта методология реализуется через реинжиниринг деятельности лабораторий, адаптацию LIMS к шаблонным бизнесс-процессам и типовой унифицированной отчётности, заложенной в приобретаемой компьютерной программе [21]. В западных программных продуктах хорошо выполнен верхний уровень управления лабораторией и цикл жизни пробы, отработана интеграция с другими корпоративными системами предприятия и автоматизированными аналитическими приборами, но практически не отражен нижний уровень – уровень самой лаборатории: методики анализа, ее внутрилабораторные нужды, например, внутрилабораторный контроль и приготовление растворов. Очень часто разработчики LIMS используют свои понятия, которые отсутствуют в российских и международных нормативных документах по аналитике, например, такие как «стандарт» в Q~DIS, «групповой показатель» в LabWare.

В основу методологии при разработке ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» был положен принцип, суть которого заключается в том, чтобы отразить работу лаборатории через такие привычные понятия, как лабораторные журналы и внутрилабораторные функции лаборатории с учетом требований отечественных нормативных документов. В соответствии с этим в ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» включены электронные лабораторные журналы, глубина проработки результатов измерений в которых, учитывающая историю получения параллельных определений и метрологическое обеспечение результирующего значения, полностью удовлетворяет любым требованиям различных методик. В системе также реализованы требования отечественных нормативных документов, касающиеся условий осуществления внутрилабораторного контроля – определения показателей качества результатов анализа для обеспечения их необходимой точности. Эта часть ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» аттестована Уральским НИИ метрологии в соответствии с требованиями МИ 2335-2003, ГОСТ Р ИСО 5725-2002, РМГ 54-2003, МУ 6/113-30-19-83 и РМГ 60-2003 (свидетельство № 2-2005 от 25 марта 2005 г.). Автоматизация внутрилабораторного контроля в рамках ЛИС/ЛИУС позволяет не только упростить работу и сократить время по его проведению, но и сделать процесс контроля прозрачным для проверок, наглядно и доступно для аналитиков отразить сложные алгоритмы, приведенные в нормативных документах. В программных продуктах зарубежного производства класса LIMS метрологические нужды лаборатории либо вообще не автоматизированы, либо сложны в использовании.

Одна из целей внедрения ЛИУС (кроме автоматизации информационного пространства лаборатории и функций обработки данных) – управление лабораторией. Качественное управление должно основываться на оперативных и достоверных данных как текущей ситуации, так и данных фактического прошлого и планируемого будущего лаборатории и ее внешней среды (обслуживаемого производства). Информационная система должна отражать динамику развития лаборатории во времени. Исследова-



Рис. 1. Карта внедрений ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» в Урало-Сибирском регионе

ние предметной области для раскрытия особенностей объектов лабораторной среды в данном направлении проведено с использованием расширенного понятия жизненного цикла (ЖЦ). Наиболее значимыми и определяющими динамику лаборатории являются ЖЦ: лаборатории, методик анализа и пробы.

В связи с этим, вторым принципом методологии, заложенным при конструировании программы ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик», является 3-х ступенчатая модель производственного аналитического контроля (рис. 2), которая позволяет описать состояние лаборатории в целом. Первичным для получения результата анализа лаборатории является процесс обработки пробы (определяет ЖЦ пробы). Протекание данного процесса обеспечивает внутрилабораторная среда, содержащая необходимые ресурсы и инструменты. Важнейшим информационным инструментом обработки пробы являются методики, которые обеспечивают жизненный цикл каждой отдельной пробы. Методики играют одну из ключевых ролей в аналитическом контроле и также имеют свой ЖЦ. Внутренняя среда лаборатории, как и методики, напрямую зависят от обслуживаемого производства – внешней среды по отношению к лаборатории. Жизненный цикл лаборатории является главенствующим в модели и определяет функционирование всех остальных.

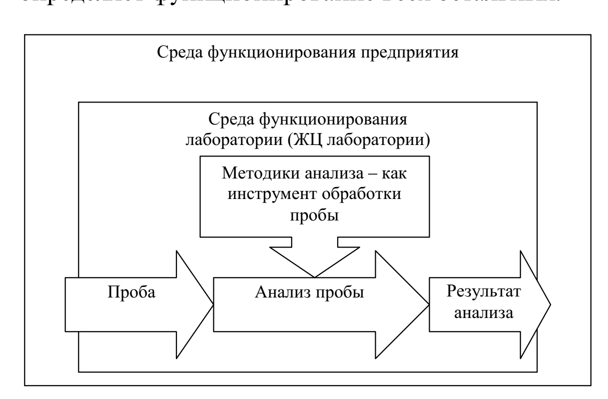


Рис. 2. *Модель производственного аналитического контроля*

Цикл жизни лаборатории, обслуживающей производство – это последовательность этапов, связанных с изменением структурных, функциональных, кадровых, нормативных и других аспектов внешней среды, определяющих деятельность лаборатории.

Цикл жизни лаборатории включает такие понятия как административно-технологическая структура предприятия (цеха, технологические установки, аппараты), объекты анализа и сама лаборатория с используемыми методиками анализа. Каждому понятию соответствует справочник или вкладка справочника ЛИУС. Информация в справочниках отражает текущее состояние административно-технологической структуры предприятия. Эти данные через контрольные точки (места отбора проб с привязкой к цехам, установкам, объектам) отражаются в лабораторных журналах лаборатории вместе с результатами анализов. Если на предприятии несколько лабораторий (лабораторных групп) охвачены одной ЛИУС, то каждая лаборатория имеет свои журналы. Далее результаты анализа могут быть представлены в виде отчетных документов лаборатории за смену (неделю, месяц, год) с выделением данных по цехам, установкам, объектам и местам отбора проб.

Если лаборатория не обслуживает определенное производство (независимая лаборатория), то цикл жизни лаборатории сужается. Но в любом случае «цикл жизни лаборатории» – основной в ЛИУС, т.к. через объекты анализа и анализируемые компоненты (показатели) он задает тематическую направленность лаборатории.

Таким образом, цикл жизни лаборатории отражает состояние лаборатории с позиций структуры и потребностей предприятия.

Цикл жизни методики анализа в лаборатории – это последовательность стадий, связанных с систематическим материальным, кадровым и метрологическим обеспечением методики анализа, обеспечивающим ее поддержание в оперативной готовности к выполнению анализов.

После того, как сформулирована тематическая направленность лаборатории и выбраны методики определения компонентов в объектах анализа, они начинают жить своей жизнью. Цикл жизни каждой методики анализа индивидуален, но в общем случае он включает следующие стадии: первичное обеспечение методики, ввод ее в действие, рабочее состояние методики анализа, модернизация или отказ от данной методики.

В ЛИУС цикл жизни методики поддерживается такими формами как справочник методик анализа, хранящий калькулятор расчета результатов параллельных определений, сведения о метрологических характеристиках методики и результатов анализа; справочник химических веществ; журналы учета реактивов; приготовления растворов; регистрации оборудования, химической посуды; контрольных процедур; калибровочных графиков. Результаты жизненного цикла методики отражаются в соответствующих внутрилабораторных документах, а метрологические характеристики результатов анализа – в записях лабораторных журналов, тем самым обеспечивается прослеживаемость измерений.

Таким образом, совокупность текущих стадий жизненных циклов методик отражает состояние лаборатории с точки зрения ее внутренних работ и определяет степень оперативной готовности к обслуживанию производства.

Цикл жизни пробы – совокупность (последовательность) работ лаборатории по конкретной пробе, включающая такие стадии как планирование отбора пробы, её отбор, доставку, регистрацию, выполнение анализов, контроль за их выполнением, утверждение результатов анализов, передачу информации о выполненных анализах и представление протокола анализа.

На предприятии годовой план работы лаборатории определяет график аналитических работ (режимные карты, рабочие программы). Цикл жизни пробы отражается в блоке управления ЛИУС и начинается с того, что сведения о контрольной точке из плана на год переносятся в план на смену и распределяются по конкретным исполнителям. Дается задание на отбор пробы, проба отбирается в контрольной точке (место отбора, цех, технологическая установка, объект анализа, список показателей), описываются условия отбора, отобранная проба доставляется в лабораторию, регистрируется в журнале регистрации проб и передается лаборанту для определения компонентов (показателей) объекта в соответствии с методикой анализа. По мере выполнения результаты анализа заносятся в лабораторный журнал, проверяется приемлемость результата, результат сравнивается с нормой. После утверждения результатов анализа создается протокол анализа пробы, который направляется в цех (заказчику), а проба направляется на утилизацию. В сравнении с зарубежными LIMS в блок управления ЛИУС «Химик-аналитик» заложена большая гибкость в настройках планов периодичности отбора проб.

Таким образом, жизненный цикл пробы в ЛИУС отражает взгляд на лабораторию и её функциональность с точки зрения оперативных планов предприятия и их выполнения.

Выше указанные подходы к конструированию информационной системы позволили создать программный продукт, обладающий универсальностью и возможностью внедрения на промышленных предприятиях, независимо от их отраслевой принадлежности, и содержащий в себе элементы системы менеджмента качества. На сегодня НИИ ВН имеет в своем арсенале динамично развивающийся программный продукт с отработанной методологической основой, который объединяет в себе функциональность лучших западных аналогов с простотой эксплуатации и удовлетворяет всем требованиям отечественной нормативной документации в области аналитической химии и метрологии. Опыт многочисленных внедрений ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» и полученные положительные отзывы потребителей являются подтверждением правильности выбранного методологического подхода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Терещенко А.Г., Терещенко О.В., Соколов В.В., Юнусов Р.Ш. АРМ «Химик-аналитик» в системе качества продукции // Качество-стратегия XXI века: Матер. Междунар. научно-практ. конф. – Томск, 11–12.11.99. – Томск, 1999. – С. 71–72.
2. Терещенко А.Г., Терещенко О.В., Соколов В.В., Замятин А.В. Программный продукт для экологических лабораторий промышленных предприятий // Экология и промышленность России. – 2001. – № 6. – С. 41–44.
3. Терещенко А.Г., Терещенко О.В., Соколов В.В., Юнусов Р.Ш., Замятин А.В., Пикула Н.П. Программный продукт для аналитических лабораторий промышленных предприятий // Партнеры и конкуренты. – 2001. – № 8. – С. 41–44.
4. Терещенко В.А., Янин А.М. Автоматизация работы экологических служб // Экология производства. – 2004. – № 2. – С. 58–63.
5. Терещенко А.Г., Толстихина Т.В., Соколов В.В., Терещенко О.В., Пикула Н.П. Организация внутрилабораторного контроля качества анализа на базе ЛИС «Химик-аналитик» // Партнеры и конкуренты. – 2004. – № 10. – С. 41–46.
6. Терещенко А.Г., Терещенко В.А., Толстихина Т.В., Янин А.М. ЛИУС «Химик-аналитик» – новый инструмент для автоматизации аналитических лабораторий // Партнеры и конкуренты. – 2005. – № 4. – С. 44–45.
7. Терещенко В.А., Янин А.М., Соколов В.В., Мизин П.А. Автоматизация работы химико-аналитического контроля с помощью лабораторной информационно-управляющей системы «Химик-аналитик» // Автоматизация в промышленности. – 2005. – № 8. – С. 56–60.
8. Терещенко А.Г., Баянова Т.В., Юшкеева Н.В., Терещенко О.В., Толстихина Т.В. Опыт внедрения лабораторно-информационной системы «Химик-аналитик» // Водоснабжение и санитарная техника. – 2005. – № 1. – С. 14–17.
9. Терещенко А.Г., Соколов В.В., Сафьянов А.С., Мизин П.А. Средство генерации выходных документов в системах управления аналитическими лабораториями // Автоматизация и современные технологии. – 2006. – № 8.
10. Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем. – 2005. – № 1. – С. 21.
11. Лабораторно-информационные системы. Обзор рынка. – М.: ЗАО «ЛИМС», 2003. – 66 с.
12. Ворыхалов А. Электронная вертикаль // Эксперт Сибирь. – 2006. – № 11(108). – С. 30–36.
13. Gibbon G. A Brief History of LIMS // Laboratory Automation and Information Management issue. – 1996. – V. 32. – P. 1–5.
14. Медицинские информационные системы. Теория и практика / Под ред. Г.И. Назаренко, Г.С. Осипова. – М.: Физматлит, 2005. – 320 с.
15. Нуцков В.Ю. Лабораторно-информационные системы (LIMS) // Промышленные АСУ и контроллеры. – 2003. – № 4. – С. 48–50.
16. Савельев Е.В. Лабораторно-информационные менеджмент-системы или автоматизация лаборатории в целом // Партнеры и конкуренты. – 2005. – № 4. – С. 41–43.
17. Самсонов А.В. Интеграция лабораторных и технологических данных – новый уровень в понимании производственных процессов // Промышленные АСУ и контроллеры. – 2004. – № 10. – С. 33–35.
18. Кубрик А.С., Потапова Т.Б., Шварцкопф В.Ф. Модуль «Лабораторные анализы» в информационно-управляющей системе «Орбита» // Промышленные АСУ и контроллеры. – 2003. – № 11. – С. 25–29.
19. Лосякова Л.И., Шелоумова Т.М., Шувалова В.И. Томин В.П., Шадрина О.К. Лабораторные системы в Ангарской нефтяной компании // Промышленные АСУ и контроллеры. – 2003. – № 9. – С. 20–22.
20. Куцевич И.В. Введение в LIMS // Мир компьютерной автоматизации. – 2002. – № 4. – С. 32–40.
21. Ойхман Е.Г., Попов Э.В. Реинжиниринг бизнеса: Реинжиниринг организаций и информационные технологии. – М.: Финансы и статистика, 1997. – 336 с.